

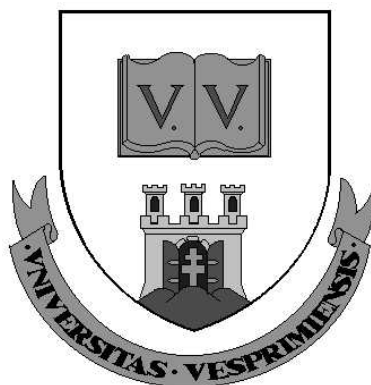
Doktori (PhD) értekezés tézisei

AZ A PRIORI ISMERETEK ALKALMAZÁSA
A VEGYIPARI FOLYAMATMÉRNÖKSÉGBEN

MADÁR JÁNOS

Veszprémi Egyetem
Vegyésmérnöki Tudományok Doktori Iskolája

Témavezető:
dr. Abonyi János
egyetemi docens



Veszprémi Egyetem
Folyamatmérnöki Tanszék
Veszprém

2005

1. ELŐZMÉNYEK ÉS CÉLKITŰZÉS

A vegyipari folyamatok modellezése, modell alapú szabályozása és optimalizálása a folyamatmérnökség nagy ipari jelentőséggel bíró, dinamikusan fejlődő ága. Ennek ellenére ez a szerteágazó terület még ma is sok megoldatlan problémával szolgál. Ennek egyik oka az, hogy a hagyományos folyamatmérnöki, illetve számítástechnikai eszközök alkalmazása gyakran ütközik akadályokba, mivel a folyamatmérnöki problémák megoldása során a feladat konkrét jellegétől függően más és más módszerek állnak rendelkezésre, amelyek nem tudják hasznosítani az összes rendelkezésre álló ismerttet.

A kutatómunka célja olyan új számítási intelligencia eszközök kidolgozása volt, amelyek alkalmasak arra, hogy a különböző forrásokból származó, különböző formában reprezentált, különböző érvényességi körű ismereteket és modelleket egységes keretben tudjuk felhasználni. Tehát a munka során azt a kérdést vizsgáltam többféle szempontból, hogy hogyan lehet a folyamatmérnökségben már rendelkezésre álló eszközökön és módszereken a vizsgált rendszerről különböző forrásokból rendelkezésre álló ismeretek segítségével javítani. A kutatómunkám célja az ehhez a problémakörhöz kapcsolódó algoritmusok és számítógépes programok kidolgozása és megvalósítása volt.

2. AZ ALKALMAZOTT MÓDSZEREK

A doktori értekezésem elsősorban a vegyipari folyamatok, különös tekintettel a kémiai reaktorok, modellezéséhez, szabályozásához és optimalizálásához járul hozzá. Így az új eredmények kidolgozásában és bemutatásában főleg a folyamatmérnökségben elterjedt jellemző

szimulációs vizsgálatokat és modellezési technikákat alkalmaztam. Az értekezésben bemutatott vizsgálatok többek között magukban foglalják egy folyamatosan kevert üstreaktor, egy szakaszos fermentációs reaktor és egy folyamatos polimerizációs reaktor szimulációs példáját. Ezek a példák a szakirodalomban jól ismertek, ezért a dinamikus modelljeiket a szakirodalomból vettem. A kutatómunka során a szimulációs vizsgálatokat a MATLAB felhasználói szoftverben valósítottam meg.

3. ÚJ TUDOMÁNYOS EREDMÉNYEK

Az értekezésben bemutatott új tudományos eredmények ismertetése előtt ki kell emelnem, hogy a disszertációm téziseit nem annyira egy konkrét feladat köti össze, hanem egy problémakör. Ezért a tézisek kevésbé szorosan kapcsolódnak egymáshoz, mint a szokásos doktori disszertációkban.

1. Tézis. Folyamatoptimalizálás esetén fellépő egymásnak ellentmondó, nehezen formalizálható célok kezelése a felhasználó értékelésbe történő bevonásával.

A folyamatoptimalizálásban gyakori nehézség, hogy egymásnak ellentmondó, nehezen formalizálható vagy számszerűsíthető célokat kell egy időben figyelembe venni. Ilyen esetekben a klasszikus megközelítés, vagyis egy kvantitatív célfüggvény felállítása, nehézkes, sőt értelmetlen is lehet. Ezért egy olyan interaktív optimalizáló algoritmust dolgoztam ki, amely úgy kezeli az ilyen optimalizációs feladatokat, hogy bevonja a folyamatmérnököt az értékelés folyamatába, tehát a mérnöki, szakértői ismereteket közvetlenül alkalmazza az optimalizálási feladatban. Ez a

módszer számítógépes grafikában és számítógépes tervezésben már sikeresen volt alkalmazva, de a folyamatmérnöki területen még nem alkalmazták. Az algoritmus kidolgozása során ezt a technikát adaptáltam a jellemző folyamatmérnöki problémákhoz, és olyan megoldást fejlesztettem ki, amely hatékonyan és egyszerűen használható a folyamatmérnökségben. A kifejlesztett eszköz gyakorlati hasznossága abban rejlik, hogy segítségével sok esetben gyorsabban és könnyebben érthető/átlátható módon lehet az ellentmondó célok és feltételek között megfelelő kompromisszumot kötni, mint a hagyományos módszerekkel. Ezt egy szabályozó hangolás és egy biokémiai reaktor optimalizálás problémájával demonstráltam szimulációs keretek között.

2. Tézis. A mérési adatokból történő modell struktúra és modell rendűség identifikáció javítása az ortogonális legkisebb négyzetek módszerével.

A mérési adatokból történő modellalkotás egy kevésbé elterjedt, de a tudományos irodalomban egyre népszerűbb megközelítése, a mérési adatokon alapuló nemlineáris modell struktúra identifikáció genetikus programozással. Felismertem, hogy a genetikus programozás hajlamos túlzottan összetett struktúrákat identifikálni, különösen ha a mérési adatok zajjal terheltek, de a szakirodalomban található munkák alig szentelnek figyelmet ennek a problémának. Ezért egy olyan új módszert dolgoztam ki, amely struktúra identifikáció során az ortogonális legkisebb négyzetek módszerét használva kiszűri a felesleges tagokat a paramétereiben lineáris modellekből, ami egyszerűbb, áttekinthetőbb modelleket eredményez. Ez az új technika nemcsak dinamikus nemlineáris modell struktúrák identifikációjára, de modellrendűség meghatározására is használható. A

kidolgozott módszer hatékonyságát kémiai reaktorok modellrendűségének vizsgálatával mutattam be.

3. Tézis. Mérési adatokon alapuló kinetikai paraméter becslés javítása *a priori* ismeretek segítségével.

A kémiai reaktorok vizsgálata során gyakran előfordul, hogy a mérési adatok száma kicsi, a mérési pontok időben egyenlőtlenül oszlanak el. Ilyen esetekben a mérési adatok felhasználása előtt valamilyen interpolációs módszert kell alkalmazni, hogy a mért tulajdonságokat meg tudjuk becsülni a mérési pontok között, és hogy a mérési zaj hatását csökkentjük. Az elterjedt interpolációs módszerek egy jelentős hiányossága az, hogy nem hasznosítják az *a priori* ismerteket. Ez igaz a jól ismert és a gyakorlatban elterjedt köbös spline interpolációra is. Ezért egy olyan új módszert fejlesztettem ki, amelyben a mérési adatokra vonatkozó *a priori* ismereteket (mint például anyagmérlegek, előzetes ismeretek a mért adat viselkedéséről) korlátok formájában figyelembe tudja venni, ami által a mérési adatok hatékonyabban hasznosíthatóak. Egy szimulált reaktor és egy ipari reaktor kinetikai paramétereinek becslésével demonstráltam, hogy a kifejlesztett módszer alkalmas a kémiai reaktorok mérési adataiból történő kinetikai paraméterbecslés pontosabbá tételére.

4. Tézis. A modell alapú szabályozók paraméterérzékenységének csökkentése szemi-mechanisztikus modellezéssel.

A nemlineáris modell alapú szabályozótervezés kritikus pontja a szabályozott rendszer *a priori* modelljének megalkotása. A gyakorlatban az *a priori* modell alapú szabályozó teljesítményét jelentősen korlátozza a

modell paraméterek (például a kémia kinetikai paraméterek) és a modell struktúra bizonytalansága. Ezért egy olyan hibrid modellt fejlesztettem ki, amely kombinálja az *a priori* modellezést és az *a posteriori* modellezést olyan módon, hogy egy mesterséges neurális hálózat helyettesíti a fehér doboz modell bizonytalan részét. Ennek a hibrid modellezési technikának az előnye az *a priori* modellezés technikával szemben az, hogy kevésbé érzékeny a modell bizonytalanságával szemben, amit egy kevert üstreaktor szabályozási példáján demonstráltam.

4. A SZERZŐ TÉMÁHOZ KAPCSOLÓDÓ PUBLIKÁCIÓS JEGYZÉKE

Nemzetközi folyóiratban megjelent cikkek:

J. Madár, J. Abonyi, H. Roubus, F. Szeifert, Incorporating Prior Knowledge in Cubic Spline Approximation - Application to the Identification of Reaction Kinetic Models, *Industrial and Engineering Chemistry Research*, vol. 42(17), pp. 4043-4049, 2003.

J. Madár, F. Szeifert, L. Nagy, T. Chován, J. Abonyi, Tendency Model-based Improvement of the Slave Loop in Cascade Temperature Control of Batch Process Units, *Special Issue of Computers & Chemical Engineering*, vol. 28., pp. 737-744, 2004.

J. Madár, J. Abonyi, F. Szeifert, Feedback Linearizing Control Using Hybrid Neural Networks Identified by Sensitivity Approach, *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, vol. 18(3), pp. 343-351, 2005.

J. Madár, J. Abonyi, B. Balaskó, F. Szeifert, Interactive Evolutionary Computation in Process Engineering, *Computers and Chemical Engineering*, vol. 29(7), pp. 1591-1597, 2005.

J. Madár, J. Abonyi, F. Szeifert, Genetic Programming for the Identification of Nonlinear Input-Output Models, *Industrial and Engineering Chemistry Research*, vol. 44(9), pp. 3178-3186, 2005.

Hazai folyóiratban megjelent cikk:

J. Madár, J. Abonyi, F. Szeifert, New Approaches to the Identification of Semi-mechanistic Process Models, *Acta Agraria Kaposváriensis*, vol. 8(3), pp. 205-218, 2004.

Könyvfejezetek:

J. Abonyi, J. Madár, F. Szeifert, Combining First Principles Models and Neural Networks for Generic Model Control, in *Soft Computing in Industrial Applications - Recent Advances*, pp.111-122, Springer Engineering Series, 2001.

J. Madar, J. Abonyi, Evolutionary Algorithms, Chapter 2.10. in *Instrument Engineers' Handbook, 4th Edition, Volume 2 - Process Control*, editor: B. Liptak, 2005.

Konferencia kiadványokban megjelent publikációk:

J. Madár, J. Abonyi, F. Szeifert, Generic Model Control based on Hybrid Neural Network Model, 29. *Műszaki Kémiai Napok, Veszprém*, 2001.

J. Madár, J. Abonyi, F. Szeifert, Generic Model Control based on Hybrid Neural Network Model, *Student papers of European Control Conference, Porto*, 2001.

J. Madár, J. Abonyi, F. Szeifert, Incorporating Prior Knowledge in Cubic Spline Approximation - Application to the Identification of Reaction Kinetic Models, 30. *Műszaki Kémiai Napok, Veszprém*, 2002.

Madár J., Abonyi J., Szeifert F., Dinamikus rendszerek identifikációja genetikus programozással, 31. *Műszaki Kémiai Napok, Veszprém*, 2003.

- J. Madár, F. Szeifert, L. Nagy, T. Chován, J. Abonyi, Tendency Model Based Improvement of the Slave Loop in Cascade Temperature Control of Batch Process Units, *International Conference on European Symposium on Computer Aided Process Engineering, Lappeenranta, 2003.*
- J. Madár, J. Abonyi, B. Balaskó, F. Szeifert, Interactive Evolutionary Computation for model based Optimization of Batch Fermentation, *Proceedings of the ISTAED International Conference on Artificial Intelligence and Applications, Benalmadena, 2003.*
- J. Madár, J. Abonyi, F. Szeifert, Application of Neumann's Machine of Self-Reproduction - Evolution and Artificial life in Process Engineering, *Proceedings of the International Conference in Memoriam John von Neumann, Budapest, 2003.*
- J. Abonyi, J. Madár, F. Szeifert, Priori knowledge in Process Modelling and Optimization, *CAPE Forum, Veszprém, 2004.*
- J. Madár, J. Abonyi, F. Szeifert, Population Based Algorithms for Batch Process Development, *32. Műszaki Kémiai Napok, Veszprém, 2004.*
- J. Madár, J. Abonyi and F. Szeifert, Genetic Programming for System Identification, *Proceedings of Intelligent Systems Design and Applications, Budapest, 2004.*